



TITLE:

# 計算機シミュレーションによる格子欠陥研究の現状と将来(物性研究と計算物理,研究会報告)

AUTHOR(S):

竹内, 伸

---

CITATION:

竹内, 伸. 計算機シミュレーションによる格子欠陥研究の現状と将来(物性研究と計算物理,研究会報告). 物性研究 1984, 41(5): 373-385

ISSUE DATE:

1984-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91186>

RIGHT:

常に問題を解析的方法によって追求することが可能とは限らない。このような場合 computer simulation が有力になる。また現実的なモデルでは simulate できない場合でも, simulate 可能な単純化したモデルで理論の検証には充分なことがある。統計力学のエルゴードの問題に computer simulation を適用し, その結果が予測と異なったものであり, このことが後のソリトンの発見につながっていった Fermi 達の例は印象的である。computer simulation ではパラメーターが大幅に制御可能であり, 極端条件での計算機実験ができる。このように考えると計算機実験は物性物理一般を対象とした新たな意味での実験物理とみなすべきであろう。

## 計算機シミュレーションによる格子欠陥研究 の現状と将来

東大・物性研 竹 内 伸

### § 1. はじめに

はじめに本小文で取り扱う問題を明確にしておきたい。対象とする実体は, 種々の結晶中の格子欠陥, すなわち点欠陥, 転移, 結晶粒界など, およびアモルファス物質, 特にアモルファス金属とし, 対象とする問題は, これらの原子構造およびその変化, 格子欠陥の運動が関与する諸現象とする。すなわち, 原子構造の乱れた状態およびそれが関わる諸物性が対象である。周辺の問題として, 結晶表面の問題, 結晶成長の問題があるが, ここでは議論の対象としない。

物性研究における「計算機シミュレーション」の定義は必ずしも明瞭ではない。特定の結晶のエネルギー・バンド計算なども本来「シミュレーション」の範疇に属するものであろう。しかし, ここでいうシミュレーションとは, この種の第一原理から出発したいわゆる理論計算ではなく, 第一原理からの取り扱いが不可能な, 多体効果の著しい系についての「近似的」な計算である。すなわち, 現実の物質について「原子モデル」を設定し, それについてのシミュレーションから何らかの有用な知見を得ようとする立場である。もう一つ別のタイプのシミュレーションとして, 特定の物質を対象とするのではなく, 一般性のある抽象的なモデルを作成して, それについて計算機による実験を遂行し, そこから何らかの法則性を見出そうとする研究がある。この種の研究はシミュレーションと呼ぶよりは「モデル実験」と呼ぶべきであろう。格子欠陥に関連した問題にも上記二種類のタイプのシミュレーションが行われている。以下, 実験

家の立場から本問題の現状と将来の展望について述べる。

## §2. 格子欠陥研究における計算機シミュレーションの意義

格子欠陥についての計算機シミュレーションによる研究の意義はこれまでもしばしば問われてきた。計算機シミュレーションが単に実験事実を再現するに止まるならば、そのことの積極的な意義を見出すことは困難である。すなわち、対象とする物理量や物理現象が実験的にすでに解明されている場合に、それを単に再現することは、そのシミュレーションに用いた仮定の当否のチェックになるという消極的意味にあっても（この点については後述）、何ら積極的な貢献はない。いっぽう、未知の物理量や物理現象を計算機シミュレーションによって求めた場合には、その結果の信頼性を正当に評価することが一般には困難であるという難点が常につきまとう。格子欠陥の研究において、計算機シミュレーションが何らかの積極的な貢献をもたらすのは以下のような場合であろう。

- (1) 特定の状態や現象の atomistic な構造の解明に適当な実験的手段を持たず、計算機シミュレーションによって始めて理解が可能になる場合。このような場合には、得られた結果の真実性はその現象に関連した諸物性との consistency により判断せざるを得ない。
- (2) 特定の状態あるいは現象の微視的機構が不明であるとき、シミュレーションによってその可能性をさぐり、理論的および実験的アプローチへの指針を与える。
- (3) 解析的に導出することが困難な多体効果によって生じる複雑な現象について、計算機を用いたモデル実験を行ない、ある法則性を導出する。
- (4) 未知の現象、未経験の極端条件下あるいは観測不可能な条件下で生ずる現象に関して、予知、予測を行いうる場合。

## §3. 従来の研究の概観

これまでに、計算機シミュレーションが格子欠陥分野でいかなる研究に適用されて来たかを概観し、その問題点について考察することにより、今後の研究の指針の材料としたい。

格子欠陥の研究に計算機が利用され始めたのは 1950 年代であるが、本格的なシミュレーションは、電子計算機の大型化高速化と相俟って、1960 年代以降である。初期に行われたシミュレーションの中で特に有名な研究に、結晶の照射損傷の研究がある。結晶に高速粒子（電子・中性子・イオン）が入射すると、それらが構成原子と衝突することによってその原子を格子位置からはじき出し（primary knock-on）、フレンケル対を形成する。knock-on 原子のエネルギーが大きい場合には、連鎖反動的なはじき出しが継続し、いわゆるカスケードを形成する。

このような過程は、1950年代にすでに計算機実験によって見事に visualize され、照射損傷の微視過程の定性的理解を可能にした点でその功績は大きい。primary knock-on のしきい値エネルギーが著しい方位依存性を示すことも1960年代前半にシミュレーションによって明らかにされた。以後、数多くの物質、種々のポテンシャルを用いた研究、さらに非弾性衝突効果を取り入れたシミュレーションも行われ、定量性はともかく、照射損傷の定性的な理解に寄与する所は少ない。点欠陥自身に関わる基本的物理量は、その自己エネルギーと移動のエネルギーであり、これらは原子拡散を支配する重要な量である。

金属中の原子空孔の自己エネルギーの計算は初期から数多く行われてきたが、現在ではそれが原子空孔の理解に積極的な役割を果たしているとはいえない。それは、すでに実験的に高い精度で求められているからである。一方、格子間原子に関しては、例えば fcc 金属および bcc 金属中での安定な存在状態に関して1960年代からシミュレーションが行われており、ごく最近になって始めてそれらの結果が実験的に正しいことが検証された。この場合は、シミュレーションの結果が実験家を刺激し、状態の identification を行う実験的な指針を与えた点で、消極的な貢献を果たした典型的な例である。点欠陥の移動の様子やその際のポテンシャル・エネルギーの評価に関するシミュレーションも行われているが、信頼性の高いものではなく、単にその結果を実験と比較することによって用いた原子間ポテンシャルなど計算の仮定の正当性の評価に利用できるという消極的な意味しかない。Vacancy cluster についての構造の安定性、移動のエネルギーの計算、不純物原子の存在状態および拡散に関するシミュレーションも行われているが、現状ではこの種の研究が、これらの欠陥を理解する上にどれほど積極的な寄与をしているかは疑問である。以上の静的あるいは準静的計算のほかに、点欠陥周辺の振動状態に関する計算も行われている。

原子の集団運動が関与するもう少しマクロな現象の例として相分離や析出過程などに関するシミュレーションも行われ始めたがここでは格子欠陥の範疇からはずれるので省略する。

大型計算機がシミュレーションにその威力を発揮するのは、より大規模な欠陥である転位や結晶粒界である。転位について原子間ポテンシャルを仮定した本格的な計算機シミュレーションが行われるようになったのは1960年代後半からである。これまでに monatomic な各種の金属、NaCl 型および CsCl 型のイオン結晶、Si、規則合金など比較的単純な結晶構造中の転位に関するシミュレーションが行われてきた。まず、転位芯の構造およびエネルギーの評価が行われ、弾性論的取り扱いの不可能な転位芯の状態について、半定量的な知見を与えた点で貢献を果たした。その後、これらのモデル結晶中の転位について、パイエルス・ポテンシャルやパイエルス力についての計算が行われた。最大の努力が払われたのは bcc 金属中の転位の運動に関

するシミュレーションである。その理由は、bcc 金属が他の金属と比べて低温の強度が異常に高くしかも特異な結晶方位依存性を示すことが明らかにされたからである。 $1/2\langle 111 \rangle$ のバーガーズ・ベクトルの転位を含むbcc 金属のモデル結晶を変形することによって、パイエルス力を求め、転位の移動の様子を調べるシミュレーションが、筆者の研究室を含め世界の数ヶ所で試みられた。その結果は、(i) らせん転位のパイエルス力は概して大きく、実験で観測される結晶方位依存性をかなり再現すること、(ii) 刃状転位のパイエルス力はらせん転位のそれより桁ちがいに小さいこと、(iii) Naに関する対ポテンシャル (Pseudopotential 法による) を用いて、bcc 構造中のらせん転位と hcp 構造中のらせん転位のパイエルス力を計算すると、前者が後者より桁ちがいに大きいこと、などが明らかにされた。結局、遷移金属のみでなくアルカリ金属や規則合金のbcc 金属がすべて共通して大きい低温強度を示す理由は、bcc 構造の幾何学的特徴に基づいて、 $1/2\langle 111 \rangle$ のらせん転位のパイエルス・ポテンシャルが大きいことによるのであるということが、少なくとも定性的には、理解できたといえる。しかし、幾何学的特徴のとらえ方、概念化には必ずしも統一的理解が得られていない。量的な面では、シミュレーションで得られるパイエルス力は、絶対零度へ外挿した降伏応力から実験的に評価される値より概して数倍大きい。NaCl 型のイオン結晶中の転位芯の構造やパイエルス力のシミュレーションも試みられているが、パイエルス力はやはり実験値より数倍大きな値を与える。計算と実験のこの量的相異の一般的傾向がどのような理由によるかは現在まだ不明である。計算に用いるポテンシャルに共通した欠陥があるのか、実験的に評価される値が理想化された直線転位の準静的なパイエルス力に対応しないものなのか、今後解決すべき問題である。

近年、より複雑な構造を有するhcp 結晶中の非底面転位や化合物結晶中の転位についての転位芯構造やその移動についてのシミュレーションが行われている。その結果は実験結果と対比して議論され、これらの結晶の塑性の特徴を転位芯構造との関連で理解しようと試みられている。一般に結晶構造が複雑になれば転位芯構造も複雑になり、さまざまな転位の拡張状態 (部分転位への分解) が可能となり、その拡張状態が転位の移動の仕方に決定的な役割を果すのである。

計算機の能力の限界から、転位に関するシミュレーションは殆んど直線転位、すなわち二次元的な計算に限られて来た。転位のキンクに関するシミュレーションも二、三行われてはいるが、モデルサイズが充分ではなく、有用な結果が得られているとはいえない。その他、転位と不純物原子との相互作用、高速運動転位からのフォノンの放出などに関するシミュレーションが行われている。

atomistic な計算でない転位運動に関するシミュレーション、すなわち転位運動に関する

「モデル実験」も一つの分野をなしている。初期の有名な研究に、1960年代に行われた点障害硬化に関するシミュレーションがある。それは、迂り面状にランダムに分布した点障害を切りながら進む転位の運動を string model で取り扱い、点障害の強度と濃度の関数として臨界応力を求めたもので、障害分布の randomness と転位の flexibility の効果を定量的に明らかにした。その後、障害との相互作用領域を有限サイズにした場合や、熱活性化過程を形式的に取り入れた場合などについて拡張され、より現実に近いシミュレーションに発展している。その他、転位源から増殖した転位群の集団的な運動、異なる転位源から増殖した転位群間の相互作用を考慮した集団運動のシミュレーションなどが行われ、転位の集団運動における多体効果について考察が行われている。

転位よりさらに複雑な格子欠陥である結晶粒界に関しても、実用性との関連もあって、近年いくつかのグループでシミュレーションが行われている。対象とする粒界は、原子配列を二次元的に取り扱える傾角粒界に限定されている。粒界の原子構造やエネルギーが特に対応粒界という概念との関連で論じられている。molecular dynamics によるシミュレーションでは、粒界のエントロピーの見積り、粒界拡散、粒界移動などについての考察が行われている。さらに、粒界破壊という実用的見地から、粒界への不純物の偏析の様子がいろいろな観点からシミュレートされている。しかし、まだ特定の実験事実との関連を論じる段階には至っていない。

破壊の原子過程、クラックの伝播の原子過程についてのシミュレーションも 1970 年から試みられている。特にクラック先端での集団転位の発生に伴う弾性応力場の screening 効果が注目されている。さらにクラックの表面への化学吸着（例えば H の）の効果についても計算が行われており、破壊のミクロ機構の解明への努力がなされている。

乱れた構造の極限ともいべきアモルファス物質については、その実用性が注目され始めたことと相俟って、1970年代後半からこの種の物質に関するシミュレーションが盛んである。アモルファス金属の構造については、稠密充填構造から出発して原子間ポテンシャルを用いて緩和する方法、あるいは molecular dynamics 法で高温の液体状態からモデルを急冷する方法で、まず単体のアモルファス状態のモデルの作成が行われ、実験の動径分布関数をよく再現する結果を得、アモルファス状態の原子構造についての考察が行われている。現実には室温で安定なアモルファス金属はすべて合金であることから、その後種々の合金系についての構造モデルの作成も試みられ、一方実験的にも部分動径分布関数に関する報告が行われ始めたため、これらを対比することによって合金原子の配位の仕方などについて詳細な検討が行われるようになった。また、これらの原子構造モデルを基にして、最近では原子振動の状態密度、電子の状態密度の計算が行われ、実験結果との比較が行われている。さらに、筆者の研究室などでは、現実的と思

われる構造模型を用いて、計算機内で塑性変形や molecular dynamics 法による焼鈍実験を行ない、塑性変形の微視的過程や構造緩和に関する原子過程を明らかにしようとする試みが行われている。

#### § 4. 従来の研究の特徴と問題点

atomistic なシミュレーションに関する最大の問題点は、当然のことながら、原子間の相互作用ポテンシャルの選択にある。従来から用いられてきたポテンシャル、(i) Van der Waals 結晶に対する Lennard-Jones ポテンシャル、(ii) pseudopotential 法による simple metal に関するポテンシャル、(iii) イオン結晶に対する静電ポテンシャル+Born-Mayer 型反撥ポテンシャル、(iv) 弾性定数、phonon 分散関係などの物性値に合致するように定めたいわゆる empirical potential が主要なものである。多くは中心力ポテンシャルであるが、(ii) では体積依存項を含む。(iv) でも含ませる場合がある。) その他、bond angle をパラメータに取り入れた四配位結晶についてのポテンシャル、遷移金属について d 電子の結合エネルギーを tight-binding 近似で取り入れたポテンシャルなどがあるが、いずれも parametric なものである。(iv) に比べて (i)(ii)(iii) はそれぞれの物質に対して比較的精度の高いポテンシャルと考えられる。しかし、今までの格子欠陥のシミュレーションの殆んどは、(iv) の empirical potential を用いた金属を対象としたものである。

完全結晶からの格子変位が小さい場合は、完全結晶の性質に準拠して定められた empirical potential がよい近似になるのは当然であるが、転位や格子間原子、結晶粒界のように原子変位が大きい場合にはその精度は全く当てにならない。にもかかわらず、格子間原子の存在状態\*など定性的な幾何学的情報に関しては、単純なポテンシャルによって正しい予測をしていたことが明らかになっている。このことは次のように解釈されよう。金属中の複雑な欠陥のエネルギーを支配しているのは、主として接近する原子対間の反撥ポテンシャルであって、引力ポテンシャルは minor な寄与しかしない。そのために、格子欠陥の状態は金属の種類に比較的鈍感で、その構造はおもにその金属の結晶構造という幾何学的因子によって規定されている。従って、適当な原子間ポテンシャルによって、欠陥の構造に関して第一近似的な予測が可能になっているのである。この点は、実験的な側面からいえば、例えば、さまざまな結合様式に基因する bcc 金属（アルカリ金属、遷移金属、金属間化合物など）の中の転位がかなり共通した挙動

---

\* fcc および bcc 中の格子間原子は、それぞれ [100] split 型, [110] split 型のみが安定であるということは 15 年以上前のシミュレーションで予測されていたが、それらが Huang 散乱, channelling などで実験的に確認されたのはここ 4~5 年のことである。

を示すこと、アモルファス金属がすべて共通した動径分布関数を示すことなどに反映している。しかし、格子欠陥の自己エネルギーの値や、移動のエネルギーなど定量的な面では、シミュレーションで得られる値は殆んど信用できないのが現状である。

要するに、従来行っていた特定物質に関するシミュレーションは、実は真のシミュレーションではなく、同種物質に関する「モデル実験」であったといえることができる。そのモデル実験の範囲では大体において正しい結果を与えていたのであるが、モデル実験である以上定量性はない。すなわち、同一種属の結晶に関する定性的第一近似的な結果は正しくても、例えばCuとAu, FeとMoの間の物理量の差異を論じられる段階には至っていないのである。

それでは、今日まで行われた atomistic な計算は如何なる点で格子欠陥の物理に貢献して来たのであろうか。まず第一には、この種の計算が行われる以前には、実体が殆んど把握できていなかった、極端に言えば雲をつかむような対象であった複雑な格子欠陥、たとえば転位芯や結晶粒界の構造、照射損傷によるカスケードの形成などが、その精度は別として、その実体が明確化され、視覚化されまたある場合には概念化されたという点が挙げられよう。このことによって、その後の実験的あるいは理論的研究に刺激を与え、ある場合にはその指針となったという功績は小さくないと思われる。さらに消極的な意味での貢献として、シミュレーションとその後の実験事実との対比の結果、いかなるポテンシャルがどのような問題に対して有効であるのか、またどの種の問題に対して無力であるかという経験を積んで来たことにより、この種の研究の将来への指針を与えている点が挙げられよう。

もう少し積極的な意味での貢献の例として、筆者も関与しているため我田引水のきらいが無くもないが、bcc 金属の低温塑性の特異性が、転位芯の挙動に関するシミュレーションによってかなり“理解”することが可能になったこと、アモルファス金属の構造が dense-random packing という概念で表現できることが明らかになったことなどが挙げられよう。点欠陥、結晶粒界に関しては、特に積極的な役割を果たした例は少いようである。転位の運動に関するモデル実験では、点障害硬化機構の定量性に貢献し、zipper 効果など新しい概念の導入に寄与している。

総体的には、筆者の見解では、今日までに格子欠陥のシミュレーションに投入された費用と労力に対して、現時点で得られた物理的成果は必ずしも pay するものではなく、むしろそれは今後の発展への投資であったと見ることができよう。

## §5. 将来への展望

### 5.1 ポテンシャルの問題



格子欠陥の atomistic なシミュレーションの基礎をなすのがポテンシャル、すなわちイオン相対位置の関数としてエネルギーをどのように表現するかという問題である。今後、理論的立場からより精度が高く、しかも格子欠陥の計算機シミュレーションが現実可能である程度に simple な表式が種々の物質について提案されることが強く要望される。そして、このことがシミュレーション研究の将来の発展性へのカギを握っているといっても過言ではないかも知れない。

しかし、従来用いられて来たかなり“いい加減な”中心力ポテンシャルによるシミュレーションでも、前節で述べたように、結果として正しい知見を与えていた面も少なくない。従って、格子欠陥のある種の性質、特に欠陥の geometry に関連した問題は、従来の empirical potential で充分役に立つ結果が得られることを経験的に会得したのである。要は、シミュレーションで得られた結果の内、何が信用でき何が信用できないのかを予じめ認識した上で、計算機実験の目的を明確にする必要があるだろう。先にも述べたように、計算機実験には特定の物質を対象とした真の意味の「シミュレーション」と、同一の結合様式および結晶構造を有する一群の物質を対象とした「モデル実験」とに大別できる。前者は定量性が要求されるのに対し、後者では定量性は問題ではなく、その結晶群に共通した性質あるいは法則性を抽象することが目的である。この二つの区別を明確に意識してシミュレーションを行うことが重要である。

現時点では、格子欠陥に関しては前者の意味のシミュレーションは殆んど実現していない。それを意図した研究は数多くなされてはいるが、実際には後者の型の研究と考えるべきであったという事情はすでに述べた。今後エネルギー計算の精度が上ったとしても、それが近似的なものである以上、格子欠陥に関する計算値（形成エネルギー、移動エネルギー、パイエルス・ポテンシャルなど）に関する信頼性を評価することは難しいであろう。恐らくそれを判定する唯一の手段は次のような方法であろう。すなわち、シミュレートする欠陥と類似（原子変位量や原子配列において）の欠陥で、それに関するある物理量がすでに実験的に確立しているものを選び、その値の再現性を確かめる方法である。例えば、転位芯のエネルギー計算の信頼性は、同一ポテンシャルを用いて計算した点欠陥の形成エネルギーや移動のエネルギーの値の精度によってチェックするのである。

一方、後者の「モデル実験」はある結合様式や結晶構造に特有の共通的性質を再現するもので、それはポテンシャルの詳細に比較的 insensitive な筈であり、逆にポテンシャルに sensitive な性質はモデル実験の対象としては不適切である。しかし、モデル実験の結果の判定はやはり上述の方法をとらざるを得ないであろう。すなわち、同種の性質で既知のものを検証することによって未知の性質について得られた結果の正当性を主張するという、経験的方法であ

る。

なお、ポテンシャルの選択の問題以外に、純粋な計算技術上の諸問題もまだ充分改善の余地が残されていよう。それらの内、格子欠陥 proper の問題として、複雑な欠陥になればなるほど、構造の uniqueness の問題が深刻になる。すなわち、転位芯の構造や特に結晶粒界の構造などでは一般に多数の準安定な状態が存在しうるため、最安定状態を見出すことは必ずしも容易ではない。初期条件の取り方、境界条件の取り方になど計算方法にかなり依存する面があるので、この種の計算技術の発展も今後に期待される重要な課題である。

以下、今後に発展が期待される具体的諸問題を取り上げてみたい。

## 5.2 点欠陥

比較的単純な点欠陥、すなわち単体結晶の原子空孔や格子間原子に関しては、第一原理からの計算精度が今後ますます高くなると考えられるので、ここでいうシミュレーションの対象からは除外すべきであろう。しかし欠陥クラスターや複合欠陥についての問題はシミュレーションに頼らざるを得ない。

[ di-vacancy, tri-vacancy -----, di-interstitial, tri-interstitial----- などの構造, その安定性など ]

を従来の経験的手法の延長としてシミュレートすることは、過剰欠陥の集合体の発生、成長などの機構についての基礎データとして、照射損傷の理解に役立つものである。

点欠陥の運動に関連した問題で、モデル実験に頼らなければならないものも多いと思われる。

[ ブロッキング ( 固溶原子周辺に同一の原子を寄せつけない ) を伴う高濃度固溶体中の固溶原子 ( 例えば金属中の H ) の拡散係数 ]

[ 母相と拡散係数の異なる第二相がランダムに分散するパーコレーション的な系における不純物拡散 ]

などに関するシミュレーションが考えられる。その他、実際的な問題として

[ 原子炉第一炉壁のような高温、重照射下における照射損傷 ]

に関するシミュレーションなどは、実験が不可能な極端条件下の現象に従来の経験的手法を適用しうる問題の一つである。

## 5.3 転位

転位について計算機シミュレーションに頼らざるを得ない重要な問題は、弾性論の適用不能な転位芯に関わる問題、すなわち電子的構造を含めたその構造、パイエルス・ポテンシャル、不純物原子との相互作用などである。転位芯の原子構造については、以前は観察手段を全く持たなかったため、モデル計算に全面的に頼らなければならなかったし、モデル計算をチェック

竹内 伸

する手段もなかったのであるが、最近では電子顕微鏡技術の発達によって実験的アプローチがかなりの所まで可能になって来た。まず、ウィーク・ビーム法の開発によって転位の拡張状態が精度よく得られるようになったので、例えばダイヤモンド構造の種々の結晶中の転位がすべて拡張していることが明らかになり、これら物質中の転位に対する考え方に大きな影響を与えたのである。ごく最近では格子像観察によって転位芯の原子構造がかなりの精度で求められるようになった。但し、転位線に垂直なバーガーズ・ベクトル成分の原子変位しか観察できないという制約があるため、純刃状転位以外の転位芯構造に関しては実験的に解明することが困難である。そこで、刃状転位についてシミュレートした結果と格子像観察を比較することによって用いた原子間ポテンシャルのチェックを行ない、そのポテンシャルで他の転位のシミュレーションを行なうという方法が考えられる。対象とする物質は従来 monatomic な金属が殆んどであったが、今後は、

〔金属に限らず非金属、化合物結晶中の転位芯の構造について、上記の実験的チェックを併用して求める〕

ことが行なわれるであろう。

〔パイエルス力、パイエルス・ポテンシャル〕

をシミュレーションで求めることに関しては、その定量性が今後どの程度改善されるかを予測することは難しいが、実験と比較することによる試行錯誤の経験を経て、次第に信頼性が高まることが期待される。パイエルス・ポテンシャルは結晶塑性に関わる転位の最も基本的性質であるが、たとえば fcc 金属中の転位のパイエルス・ポテンシャルが何故  $10^{-5}G$  ( $G$ : 剛性率) という小さい値を示すのかは全く「理解」されていないのである。 $10^{-5}G$  という小さいパイエルス力を精度よくシミュレートすることは計算技術上からも現在の計算機的能力では不可能であり、今後の計算機のレベルアップも将来の発展にとって重要な因子である。

次に重要な課題として

〔キンクおよびキンク対の原子構造、その自己エネルギーおよびその移動エネルギー〕

に関するシミュレーションがある。キンクに関するシミュレーションにはかなり大きな三次元結晶モデルを用いる必要があるため、やはり現在の計算機的能力では不足である。しかし、パイエルス機構による転位の運動は、キンク対形成とキンク移動の過程を経て行われるので、従来の string model を越えてより深く理解する(例えば転位運動の活性化エネルギーの応力依存性などについて)ためにはキンクに関する正確な知識は不可欠である。

〔転位と異種原子との相互作用〕

は固溶体硬化機構や不純物の偏析などの問題を定量的に評価する上に重要であるが、従来は主

として弾性論に基づく近似的な取り扱いのみであった。ただし、転位芯の状態がシミュレーションで明らかになったのちは、それと不純物との相互作用の問題はシミュレーションよりはむしろ理論計算の範疇に属する問題かも知れない。また、

〔転位芯にそった原子拡散〕

の問題も実際的な面から重要な研究課題の一つである。

〔転位に附随した局在振動に関するシミュレーション〕

は転位に関するダイナミカルなシミュレーションの内の重要テーマである。それは、転位運動の熱活性化過程を理解する上に欠くことのできない問題だからである。

転位が関与したもう少しマクロな塑性の問題として、

〔転位の集団運動に関するシミュレーション〕

がある。転位は長距離の歪み場を伴うため、長距離にわたって相互作用しながら運動し、しかも増殖、消滅を伴いながら塑性変形が進行する。このような複雑な多体効果のため、高温での結晶の定常変形状態、低温での準定常変形状態がどのような機構で実現するのかまだよく理解されていない。大容量の計算機による塑性変形のモデル実験によって何らかの示唆が得られるものと期待される。

#### 5.4 結晶粒界

結晶粒界は、二つの結晶の方位関係と粒界面方位がパラメータとなるため、結晶学的に5つの自由度を持っている。実際にシミュレーションが行われているのはその内の傾角粒界という特殊なものに限られているし、将来も恐らくそれ以外の粒界を取り扱うことは実際問題として殆んど不可能であろう。しかし、シミュレーションが可能な範囲の中からも、何らかの一般性を見出しうる可能性はあろう。なお、刃状転位の場合と同様、傾向粒界の場合は電子顕微鏡を用いた格子像観察によって構造の観察が可能になったので、構造をシミュレートするのみでは意味がなく、粒界に関する種々の性質に関するシミュレーションが今後期待される問題である。

〔粒界構造とエネルギーの関係〕

については対応粒界という概念の意味を明確にするためにも、また再結晶過程での集合組織の形成の問題とも関係するので重要な問題である。

〔粒界への不純物の偏析と粒界の凝集力〕

に関するシミュレーションは粒界破壊という実際的問題に関わるテーマであるが、転位への偏析の場合と同様、不純物原子と粒界との相互作用についての理論的取り扱いが課題である。

〔粒界拡散、粒界移動、粒界沁り〕

竹内 伸

などに関してダイナミカルなシミュレーションを行うことによって何らかの一般的な法則性を見出すことは、これらが再結晶、超塑性現象、高温クリープなどの機構に直接関わるので、その意義は非常に大きい。

### 5.5 アモルファス金属

アモルファス金属の構造についてはすでに多くのシミュレーションが試みられ、現在実験的に得られている情報をかなりよく再現することに成功している。今後は、むしろ実験的な面での進歩を待ちながら、それに応じてシミュレーションによる構造の identification の研究を進めて行くべきであろう。アモルファス物質のマイクロ構造は、実験とシミュレーションが相補的な役割を果す研究対象の典型と考えられる。

構造について信頼が置けるモデルが作成された次の段階のシミュレーションとして

〔アモルファス金属の原子振動状態、電子の状態密度の計算〕

を行ない、それらがアモルファス特有の構造とどのように結びついているのかを解明する研究はすでに始められている。もう少し実際的な問題としては

〔強磁性アモルファス金属の磁気異方の解明〕

〔アモルファス金属の塑性変形機構の解明〕

などのテーマがあり、後者についてはすでにかんがりの研究が行なわれている。ダイナミカルなシミュレーションの例として

〔アモルファス金属中の原子拡散機構およびクリープ変形機構〕

〔アモルファス金属特有の構造緩和現象の解明〕

などは、結晶とは異なるアモルファス構造特有の現象であり、atomistic なシミュレーションの果す役割は大きいと考えられる。

### 5.6 破壊

脆性破壊の問題は、従来は主としてマクロな観点からの研究が主流であった。破壊の発生、進行に関する atomistic なアプローチは近年米国で研究が始められた。この問題は将来性の大きな課題であるといえよう。

〔クラックの進行に関する atomistic なアプローチ〕

は比較的大きなモデルを必要とする。特に、転位の発生、運動による塑性緩和を伴う場合には、さらに大規模なモデルを要するため、計算機能力の増大が望まれる。

〔表面吸着による脆性の促進効果〕

に関するシミュレーションも実用に関わる問題として、その微視的機構の解明は重要である。

## §6. 結 び

シミュレーションには特定の物質の特定の現象を対象とした真の「シミュレーション」と、ある物質群を表現するモデルあるいは対象を抽象化したモデルに関する「モデル実験」の二種類の研究がある。従来行われて来た格子欠陥に関するシミュレーションは、前者を意図した研究であっても、結局は後者のタイプの研究であると見做せる場合が殆んどである。そして、その限りでは概して妥当な結果が得られていた。しかし、シミュレーションの結果の評価を最終的には実験に委ねるのであればその意義は小さい。シミュレーションは、本来、実験的あるいは理論的に解明することが困難な問題を明らかにすることによって始めて積極的な意義が生じるのであるが、それだけに、その得られた結果に対する信頼性はそれまでの経験と、関連する物性との consistency に頼らざるを得ないという宿命がある。その点、最近のミクロな観察技術の著しい進歩が格子欠陥の構造のある special case についてはシミュレーションの結果をチェックすることを可能にしており、シミュレーションの信頼性の評価に果す役割は大きいと思われる。

格子欠陥のように原子構造が著しく乱れた状態に関わる物性は、理論的には第一原理からの取り扱いが不可能であり、実験的には適切な研究手段を持たない場合が多い。従って、今後も格子欠陥分野において計算機シミュレーションの果す役割は、シミュレーションの意味とその結果の適用限界を見極めつつ行うかぎり、誠に大きいものである。

最後に、本テーマに関連した単行本二冊を挙げる。

“*Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects*” edited by P. C. Gehlen, J. R. Beeler Jr. and R. I. Jaffee, Plenum Press, New York-London, 1972.

“*Interatomic Potentials and Crystalline Defects*” edited by J. K. Lee, The Metallurgical Society of AIME, Warrendale, Pa., 1981.

## 表面物理と大規模数値計算

東大・理 塚 田 捷

## §1. はじめに

表面物理の研究における大規模数値計算の役割について概観してみたい。表面研究の基礎は